

Таблица 1.

Расчетные энергетические параметры конформационной изомеризации эфиров метилборной кислоты (ккал/моль)

№	Параметры*	RHF/STO-3G	RHF/3-21G
<b>1</b>	$\Delta E_{I,II}$	8.1	4.5
	$\Delta E_{I,III}$	3.7	5.1
	$\Delta E^{\ddagger}_{I,II}$	13.5	10.0
	$\Delta E^{\ddagger}_{I,III}$	12.1	7.4
<b>2</b>	$\Delta E_{I,II}$	4.2	4.6
	$\Delta E_{I,III}$	6.2	3.2
	$\Delta E^{\ddagger}_{I,II}$	10.8	8.2
	$\Delta E^{\ddagger}_{I,III}$	8.7	5.3
<b>3</b>	$\Delta E_{I,II}$	6.7	6.5
	$\Delta E^{\ddagger}_{I,II}$	10.1	9.0
<b>4</b>	$\Delta E_{I,II}$	2.2	3.7
	$\Delta E_{I,III}$	4.6	4.6
	$\Delta E^{\ddagger}_{I,II}$	12.4	8.5
	$\Delta E^{\ddagger}_{I,III}$	8.9	6.0

\*<sup>)</sup> Относительно конформера I

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Ferrier R.J. Methods in Carbohydrate Chemistry. New York-London, 1972. V.6. P.419.
2. Carlsohn H., Hartmann M. // Acta Polymerica. 1979. V. 30. N 7. P.420.
3. Kliegel W. // Die Pharmazie. 1972. V.27. N 1. P.1.
4. Caujolle F., Chanh P.H., Maciotta J.C. // Agressologie. 1969. V.10. N 2. P.155.
5. Несмеянов А.Н., Соколик Р.А. Методы элементоорганической химии. Бор, алюминий, галлий, индий, таллий. М.: Наука, 1964. 499 с.
6. Валиахметова О.Ю., Бочкор С.А., Кузнецов В.В. // Успехи современного естествознания. 2008. № 10. С.57.
7. HyperChem 7.01. Trial version. [www.hyper.com](http://www.hyper.com).
8. Грень А.И., Кузнецов В.В. Химия циклических эфиров борных кислот. Киев: Наукова думка, 1988. 160 с.

световым излучением и обычными радиоволнами, оно обладает некоторыми свойствами и света, и радиоволн.

2. Использование СВЧ технологий касается многих отраслей человеческой деятельности, однако в свое время именно СВЧ-радиолокация оказалась эффективным электронным средством раннего обнаружения удаленных объектов противника. Радиоволны СВЧ-диапазона широко применяются в технике связи. Кроме различных радиосистем военного назначения, во всех странах мира имеются многочисленные коммерческие линии СВЧ-связи. Самой распространенной из них является мобильная телефония, современные телекоммуникации и беспроводной Интернет. Система ретрансляционных радиобашен, необходимая для передачи СВЧ-излучения на большие расстояния, может быть построена только на суше. Для межконтинентальной же связи требуется иной способ ретрансляции, основанный на связных искусственных спутниках Земли, выведенных на геостационарную орбиту. Спутники последней межконтинентальной серии «Интелсат» были выведены в различные точки геостационарной орбиты таким образом, что зоны их охвата, перекрываясь, обеспечивают обслуживание абонентов во всем мире. Каждый спутник серии «Интелсат» последних модификаций предоставляет клиентам тысячи каналов высококачественной связи для одновременной передачи телефонных, телевизионных, факсимильных сигналов и цифровых данных.

3. Современные исследования показали возможность воздействия на биологические объекты СВЧ волнами, так называемая КВЧ терапия использует миллиметровые волны для лечения некоторых заболеваний. Создано несколько диагностических комплексов с использованием СВЧ, которые в ряде случаев могут использоваться также и в ветеринарной медицине для предотвращения некоторых видов заболеваний птицы,

#### СВЧ-ИННОВАЦИИ

Крупенин В.Л.

Учреждение Российской академии наук  
Институт машиноведения  
им. А. А. Благонравова РАН  
Москва, Россия

1. Среди большого числа инновационных предложений последнего времени особую нишу занимают предложения, касающиеся все возрастающей роли использования прорывных СВЧ – технологий. Диапазон сверхвысоких частот (СВЧ) - 100МГц - 300 ГГц. В англоязычных странах этот частотный диапазон называется микроволновым; имеется в виду, что длины волн очень малы по сравнению с длинами волн обычного радиовещания, имеющими порядок нескольких сотен метров. Так как по длине волны излучение СВЧ-диапазона является промежуточным между

для лечения крупного рогатого скота и в др. случаях.

Нельзя не упомянуть о недавней отечественной инновационной разработке, позволившей, в частности создать прибор для диагностики качества сосудистой системы человека с помощью сверхширокополосного измерителя скорости пульсовой волны. Новая технология – сверхширокополосные радары – позволяет реализовать проверку эластичности сосудистой стенки артерий бесконтактно за счет контроля изменения параметров кровотока, протекающего в зоне слабого электромагнитного поля, излучаемого радаром. Одновременно радар позволяет регистрировать другой важный диагностический параметр – вариабильность (изменение) сердечного ритма. Высокая точность измерения достигается за счет очень малой длительности электромагнитных импульсов, излучаемых и принимаемых сверхширокополосным радаром – от единиц наносекунд до десятков пикосекунд.

4. СВЧ-инновации сыграли и еще сыграют важную роль в весьма актуальных научных исследованиях, например электронных свойств твердых тел. Когда тело оказывается в магнитном поле, свободные электроны в нем начинают вращаться вокруг магнитных силовых линий в плоскости, перпендикулярной направлению магнитного поля. Частота вращения, называемая циклотронной, прямо пропорциональна напряженности магнитного поля и обратно пропорциональна эффективной массе электрона. Если на твердое тело, в магнитном поле, падает излучение СВЧ-диапазона, то оно сильно поглощается, когда его частота равна циклотронной частоте электрона.

Данное явление называется циклотронным резонансом; оно позволяет измерить эффективную массу электрона. Такие измерения дали много ценной информации об электронных свойствах полупроводников, металлов и металлоидов. Кроме того, с помощью мощных СВЧ генераторов миллиметрового диапазона волн - гиротронов на циклотронной частоте производится нагрев плазмы в термоядерных установках. Излучение СВЧ-диапазона играет важную роль также в исследованиях Космоса.

И это не говоря о «простых» бытовых СВЧ-печках. Нет сомнений в том, что СВЧ-технологии – одни из самых прорывных инноваций прошлого и нынешних веков.

### КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСОВ, ОБРАЗОВАННЫХ СОЕДИНЕНИЯМИ БОРА

Кузнецов В.В.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Уфимский государственный нефтяной технический университет

<sup>2</sup>Институт физики молекул и кристаллов

Уфимского научного центра РАН  
Уфа, Россия

Интерес к структурным исследованиям соединений тригонального бора связан с особенностями их строения (присутствие электроноакцепторного атома бора), наличием ценных фармакологических свойств, а также с использованием в качестве реагентов тонкого органического синтеза [1,2]. Необходимость корректной оценки геометрических и энергетических параметров таких систем и их изменения в присутствии молекул растворителя, а также важная роль компьютерного моделирования в современных структурных исследованиях делают актуальной проблему оценки применимости квантово-химических методов к анализу строения молекулярных комплексов соединений бора.

Настоящая работа посвящена оценке применимости полуэмпирических (AM1, PM3) и неэмпирических [RHF/STO-3G, 3-21G, 6-31G(d)] квантово-химических методов к расчетам энталпии образования ряда молекулярных комплексов соединений бора и длин донорно-акцепторных связей бор-элемент в рамках программного обеспечения HyperChem [3]. В качестве объектов исследования использованы комплексы ациклических соединений бора с азот-, фосфор- и кислородсодержащими лигандами, для которых известны соответствующие данные эксперимента [4].

Таблица 1.

№	Соединение	Эксперимент (метод)	Методы расчета (относительная погрешность, %)				
			AM1	PM3	STO-3G	3-21G	6-31G(d)
1	Me <sub>3</sub> N·BH <sub>3</sub>	1.609 (МВС) 1.656 (ЭГ)	1.660 (3) (2)	1.661 (3) (0.3)	1.670 (4) (0.8)	1.685 (5) (2)	1.677 (4) (1)
2	C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N·BH <sub>3</sub>	1.610 (МВС)	1.582 (2)	1.598 (1)	1.646 (2)	1.679 (4)	1.666 (3)
3	Me <sub>3</sub> N·BMe <sub>3</sub>	1.698 (МВС)	1.737 (2)	1.705 (1)	1.741 (3)	1.775 (5)	1.827 (8)
4	Me <sub>2</sub> NH·BMe <sub>3</sub>	1.656 (PCA)	1.688 (2)	1.681 (1)	1.711 (3)	1.752 (6)	1.764 (7)
5	Me <sub>3</sub> N·BF <sub>3</sub>	1.636 (МВС) 1.664 (ЭГ)	1.992(22) (20)	1.717 (5) (3)	1.889(15) (14)	1.641(0.3) (1)	1.677 (3) (1)
6	Me <sub>2</sub> O·BF <sub>3</sub>	1.75 (ЭГ)	1.894 (8)	1.722 (2)	1.801 (3)	1.598 (9)	1.703 (3)
7	Et <sub>3</sub> P·BF <sub>3</sub>	2.028 (PCA)	2.097 (3)	1.991 (2)	2.661(31)	2.118 (4)	2.083 (3)

Примечание: МВС – микроволновая спектроскопия, ЭГ – электронография, PCA - рентгеноструктурный анализ